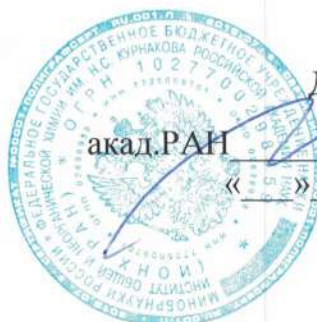


ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ.Н.С.КУРНАКОВА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

(ИОНХ РАН)



«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИОНХ РАН

акад. РАН

В.К. Иванов

2026 г.

**ПРОГРАММА ПОДГОТОВКИ НАУЧНЫХ И НАУЧНО-  
ПЕДАГОГИЧЕСКИХ КАДРОВ В АСПИРАНТУРЕ**

**Шифр и наименование области науки:** 1. Естественные науки

**Шифр и наименование группы научных специальностей:** 1.4. Химические науки

**Шифр и наименование научных специальностей:**

1.4.1. Неорганическая химия

1.4.2. Аналитическая химия

1.4.4. Физическая химия

1.4.5. Хемоинформатика

1.4.15. Химия твердого тела

**Форма обучения:** очная

**Нормативный срок обучения:** 4 года

Москва  
2026 г.

## ВВЕДЕНИЕ

Специфика высшего образования в научных учреждениях страны состоит в том, что образовательный процесс непосредственно связан с научной деятельностью, преподавание учебных дисциплин осуществляется на уровне, максимально приближенном к последним достижениям науки и практики.

Образовательный процесс реализуется выдающимися российскими учеными – действительные члены Российской академии наук, академики РАН, член-корреспонденты РАН, доктора, доценты и кандидаты наук, с использованием новейших достижений отечественной и мировой науки.

### 1. Общие положения

#### 1.1. Паспорта научных специальностей

##### 1.1.1. Паспорт научной специальности 1.4.1. «Неорганическая химия»

###### *Область науки:*

1. Естественные науки

###### *Группа научных специальностей:*

1.4. Химические науки

###### *Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:*

Химические

Физико-математические

###### *Шифр научной специальности:*

1.4.1. Неорганическая химия

###### *Направления исследований:*

1. Фундаментальные основы получения объектов исследования неорганической химии и материалов на их основе.

2. Дизайн и синтез новых неорганических соединений и особо чистых веществ с заданными свойствами.

3. Химическая связь и строение неорганических соединений.

4. Реакционная способность неорганических соединений в различных агрегатных состояниях и экстремальных условиях.

5. Взаимосвязь между составом, строением и свойствами неорганических соединений. Неорганические наноструктурированные материалы.

6. Определение надмолекулярного строения синтетических и природных неорганических соединений, включая координационные.

7. Процессы комплексообразования и реакционная способность координационных соединений. Реакции координированных лигандов.

8. Моделирование процессов, протекающих в окружающей среде, растениях и живых организмах, с участием объектов исследования неорганической химии.

**1.1.2. Паспорт научной специальности 1.4.2. «Аналитическая химия»**

***Область науки:***

1. Естественные науки

***Группа научных специальностей:***

1.4. Химические науки

***Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:***

Химические

Технические

Физико-математические

***Шифр научной специальности:***

1.4.2. Аналитическая химия

***Направления исследований:***

1. Теория методов аналитической химии.

2. Методы химического анализа (химические, физико-химические, атомная и молекулярная спектроскопия, хроматография, рентгеновская спектроскопия, масс-спектрометрия, ядерно-физические методы и др).

3. Аналитические приборы.

4. Методическое обеспечение химического анализа.

5. Математическое обеспечение химического анализа.

6. Метрологическое обеспечение химического анализа.

7. Теория и практика пробоотбора и пробоподготовки в аналитической химии.

8. Методы маскирования, разделения и концентрирования.

9. Анализ неорганических материалов и исходных продуктов для их получения.

10. Анализ органических веществ и материалов.

11. Анализ нефтехимической продукции.

12. Анализ объектов окружающей среды.

13. Анализ пищевых продуктов.

14. Анализ природных веществ.

15. Анализ лекарственных препаратов.

16. Клинический анализ.

17. Химический анализ в криминалистике.

18. Аналитический контроль технологических процессов.

19. Сертификация веществ и материалов по химическому составу.

### **1.1.3. Паспорт научной специальности 1.4.4. «Физическая химия»**

#### ***Область науки:***

1. Естественные науки

#### ***Группа научных специальностей:***

1.4. Химические науки

#### ***Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:***

Химические

Технические

Физико-математические

#### ***Шифр научной специальности:***

1.4.4. Физическая химия

#### ***Направления исследований:***

1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.

2. Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.

3. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.

4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования.

5. Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях.

6. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.

7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация.

8. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц.

9. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.

10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.

11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении.

12. Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.

#### **1.1.4. Паспорт научной специальности 1.4.5. «Хемоинформатика»**

##### ***Область науки:***

1. Естественные науки

##### ***Группа научных специальностей:***

1.4. Химические науки

##### ***Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:***

Химические

Технические

Физико-математические

##### ***Шифр научной специальности:***

1.4.5. Хемоинформатику

##### ***Направления исследований:***

1. Развитие компьютерных представлений химической структуры полимеров, кристаллов и биологических макромолекул. Разработка интерактивных графических редакторов ввода и редактирование структур, заданных с помощью различных типов внешнего представления. Создание общих принципов валидации структурных моделей.

2. Создание и развитие баз данных, содержащих информацию о структурах и свойствах полимеров, кристаллов и биологических макромолекул, а также спектральные характеристики этих соединений. Развитие и применение методов математической статистики и машинного обучения (в том числе, интеллектуального анализа данных) для работы с указанными объектами.

3. Моделирования связи “структура-свойство” (SAR/QSAR/QSPR, structure-activity relationships/quantitative structure-activity/property relationships). Молекулярные дескрипторы: классификация, характеристики и дальнейшее развитие. Решение обратной задачи в проблеме структура – свойства новых химических соединений.

4. Виртуальный скрининг – разработка новых лекарственных препаратов для поиска химических соединений, обладающих нужным видом биологической активности. Развитие вычислительных процедур, позволяющих автоматизировать просмотр баз данных и отбор химических соединений, для которых прогнозируется наличие искомых свойств.

5. «Компьютерный» синтез – методы, алгоритмы и реализующие их компьютерные программы, оказывающие помощь химику в планировании синтеза органических соединений, прогнозировании результатов и дизайне новых типов органических реакций на основе обобщения данных по известным синтетическим превращениям.

6. Молекулярный дизайн - направленная генерация структур химических соединений (молекулярных графов), которые, в соответствии с моделями, должны обладать набором заранее заданных свойств.

7. Дизайн химических структур de novo – совместное использование генераторов молекулярных графов и физико-химических моделей, описывающих взаимодействие лиганд – белок.

8. Фармакофорный поиск - поиск соответствия между набором пространственных и электронных признаков, необходимых для обеспечения оптимальных супрамолекулярных взаимодействий со специфической биологической мишенью, которые могут вызывать или блокировать её биологический ответ и характеристиками молекул из базы данных, находящихся в допустимых конформациях.

9. Прогнозирование свойств химических соединений и материалов - применении методов математической статистики и машинного обучения для построения моделей, позволяющих по описанию структур химических соединений предсказывать их свойства (физические, химические, биологическую активность).

#### **1.1.5. Паспорт научной специальности 1.4.15. «Химия твердого тела»**

##### ***Область науки:***

1. Естественные науки

##### ***Группа научных специальностей:***

1.4. Химические науки

##### ***Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:***

Химические

Технические

Физико-математические

**Шифр научной специальности:**

1.4.15. Химия твердого тела

**Направления исследований:**

1. Разработка и создание методов синтеза твердофазных соединений и материалов.
2. Конструирование новых видов и типов твердофазных соединений и материалов.
3. Изучение твердофазных химических реакций, их механизмов, кинетики и термодинамики, в том числе зародышеобразования и химических реакций на границе раздела твердых фаз, а также топохимических реакций и активирования твердофазных реагентов.
4. Изучение пространственного и электронного строения твердофазных реагентов.
5. Изучение пространственного и электронного строения твердофазных соединений и материалов.
6. Изучение динамики и диффузии молекул, ионов и атомов в твердофазных соединениях и материалах.
7. Установление закономерностей «состав – структура – свойство» для твердофазных соединений и материалов.
8. Изучение влияния условий синтеза, химического и фазового состава, а также температуры, давления, облучения и других внешних воздействий на химические и химико-физические микро- и макроскопические свойства твердофазных соединений и материалов.
9. Структура и динамика дефектов.
10. Структура и свойства поверхности и границ раздела фаз.
11. Квантово-химическое описание и предсказание строения и свойств твердофазных соединений и композиций.

**1.2. Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре** (далее – программа аспирантуры) разработана на основе федеральных государственных требований, утвержденных приказом Минобрнауки России от 20 октября 2021 г. № 951.

Программа аспирантуры по группе научных специальностей 1.4. Химические науки представляет собой комплекс основных характеристик образования, организационно-педагогических условий, форм аттестаций, который представлен в виде общей характеристики программы аспирантуры, учебного плана, календарного учебного графика, рабочих программ дисциплин, программ практик, программы научных исследований, программы итоговой аттестации, оценочных средств, методических материалов.

### **1.3. Нормативные документы для разработки программы аспирантуры**

Настоящая программа аспирантуры по научным специальностям разработана на основе следующих нормативных документов:

- Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ;
- Постановление Правительства Российской Федерации от 30.11.2021 г. № 2122 «Об утверждении Положения о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре);
- Приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 г. № 951 «Об утверждении Федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов);
- Приказ Минобрнауки России от 24.02.2021 г. № 118 «Об утверждении номенклатуры научных специальностей, по которым присуждаются ученые степени, и внесении изменения в Положение о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденное приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 10 ноября 2017 г. № 1093»;
- Постановление Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней»;
- Устав ИОНХ РАН;
- Локальные нормативные акты ИОНХ РАН.

### **1.4. Общая характеристика программы аспирантуры**

**Целью** программы аспирантуры является подготовка научных и научно-педагогических кадров с учетом современных требований к осуществлению профессиональной деятельности в области научных специальностей, а также проведение научных исследований для подготовки диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, апробации результатов научных исследований и внедрения, для получения заключения организации и (или) представления диссертации на соискание ученой степени в диссертационный совет.

В рамках осуществления научной (научно-исследовательской) деятельности аспирант решает научную **задачу**, имеющую значение для развития соответствующей отрасли науки, либо разрабатывает новые научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны.

**Срок получения образования** по программе аспирантуры по группе научных специальностей 1.4. Химические науки (очная форма обучения) составляет 4 года.

При освоении программы аспирантуры инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья указанный срок может быть продлен не более чем на один год по сравнению с установленным сроком освоения программы.

Образовательная деятельность по программе аспирантуры осуществляется на русском языке.

**Объем программы аспирантуры** (без факультативных дисциплин) составляет 240 зачетных единиц (далее – з.е.).

Образовательный процесс по программе аспирантуры разделяется на учебные курсы.

Учебный год по очной форме программы аспирантуры начинается с 01 октября.

В учебном году устанавливаются каникулы общей продолжительностью не менее 6 недель и не более 8 недель.

### **1.5. Требования к уровню подготовки, необходимые для освоения программы аспирантуры**

К освоению программ аспирантуры допускаются лица, имеющие высшее профессиональное образование, подтвержденное дипломом специалиста или дипломом магистра, в том числе лица, имеющие образование, полученное в иностранном государстве, признанное в Российской Федерации, успешно сдавшие вступительные экзамены и зачисленные в аспирантуру ИОНХ РАН для подготовки диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

## **2. Требования к структуре программы аспирантуры**

### **2.1. Структура программы аспирантуры**

Программа включает в себя научный компонент, образовательный компонент, итоговую аттестацию.

Научный компонент программы включает:

- научную деятельность аспиранта, направленную на подготовку диссертации на соискание учёной степени кандидата наук (далее – диссертация) к защите;
- подготовку публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации, в рецензируемых научных изданиях и приравненных к ним изданиях в соответствии с критериями, установленными «Положением о присуждении ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения учёных степеней»;
- промежуточную аттестацию по этапам выполнения научного исследования.

Образовательный компонент программы аспирантуры включает дисциплины и практику, а также промежуточную аттестацию по указанным дисциплинам и практике.

Итоговая аттестация по программе аспирантуры проводится в форме оценки диссертации на предмет ее соответствия критериям, установленным в соответствии с Федеральным законом от 23.08.1996 г. № 127-ФЗ «О науке и государственной научно-технической политике».

Структура и трудоемкость программы аспирантуры:

<b>Наименование компонентов программы аспирантуры и их составляющих</b>	<b>Трудоемкость, з.е.</b>
<b>1. Научный компонент</b>	
1.1. Научная деятельность, направленная на подготовку диссертации к защите	166
1.2. Подготовку публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации, в рецензируемых научных изданиях и приравненных к ним изданиях в соответствии с критериями, установленными «Положением о присуждении ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения учёных степеней»	40
1.3. Промежуточная аттестация по этапам выполнения научного исследования	4
<b>2. Образовательный компонент</b>	
2.1. Дисциплины, в том числе факультативные дисциплины, направленные на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов	20
2.2. Практика	3
2.3. Промежуточная аттестация по дисциплинам и практике	4
<b>3. Итоговая аттестация</b>	6
<b>Итого:</b>	<b>243</b>

### **3. Требования к условиям реализации программы аспирантуры**

#### **3.1. Общесистемное обеспечение реализации программы аспирантуры**

3.1.1. ИОНХ РАН обеспечивает аспиранту доступ к научно-исследовательской инфраструктуре в соответствии с программой аспирантуры и индивидуальным планом работы.

3.1.2. ИОНХ РАН обеспечивает аспиранту в течение всего периода освоения программы аспирантуры индивидуальный доступ к электронной информационно-образовательной среде (далее – ЭИОС) ИОНХ РАН посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и локальной сети ИОНХ РАН в пределах, установленных законодательством Российской Федерации в области защиты государственной и иной охраняемой законом тайны.

3.1.3. ИОНХ РАН обеспечивает аспиранту доступ к учебно-методическим материалам, библиотечным фондам и библиотечно-справочным системам, профессиональным базам данных.

3.1.4. ЭИОС ИОНХ РАН обеспечивает доступ аспиранту ко всем электронным ресурсам, которые сопровождают научно-исследовательский и образовательный процессы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре согласно соответствующим

программам аспирантуры, в том числе к информации об итогах промежуточных аттестаций с результатами выполнения индивидуального плана научной деятельности и оценками выполнения индивидуального плана работы.

3.1.5. ИОНХ РАН располагает материально-технической базой, соответствующей действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивающей проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы обучающихся, предусмотренных учебным планом.

### **3.2. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение**

3.2.1. Норма обеспеченности образовательной деятельности учебными изданиями определяется исходя из расчета не менее одного учебного издания в печатной и (или) электронной форме, достаточного для освоения программы аспирантуры, на каждого аспиранта по каждой дисциплине, входящей в индивидуальный план работы.

3.2.2. ИОНХ РАН обеспечен необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения согласно рабочим программам.

3.2.3. Обучающиеся и научные и (или) научно-педагогические работники имеют доступ к современным профессиональным базам данных, в том числе международным реферативным базам данных научных изданий, и информационным справочным системам.

В ИОНХ РАН аспирантам обеспечен доступ к фондам научной библиотеки, которая входит в систему Библиотеки по естественным наукам РАН (БЕН РАН).

Реализация программы аспирантуры обеспечивается доступом каждого аспиранта к архивам отечественных и зарубежных изданий ([http://www.benran.ru/pl\\_in\\_izd.html](http://www.benran.ru/pl_in_izd.html)), а также электронным базам данных (<http://www.benran.ru/bazi.html>) в библиотеке в Интернет-классе ИОНХ РАН.

3.2.4. ИОНХ РАН имеет специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования. Специальные помещения укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления информации большой аудитории.

3.2.5. Перечень материально-технического обеспечения, необходимого для реализации программы аспирантуры, включает в себя лабораторное оборудование в зависимости от степени сложности, для обеспечения дисциплин, осуществления научно-исследовательской деятельности и подготовки диссертации и практик. Лабораторный комплекс ИОНХ РАН включает в себя лаборатории, оснащенные на мировом уровне самым современным оборудованием.

Лаборатории оснащены современными приборами для синтеза неорганических соединений и материалов: стеклянная и пластиковая химическая посуда отечественного и иностранного производства, спектральное и лабораторное оборудование для рутинных измерений, реакционные установки, вакуумные системы, лабораторные печи, хроматографы.

3.2.6. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ИОНХ РАН.

### **3.3. Кадровые условия реализации программы аспирантуры**

3.3.1. 100 % численность штатных научных и (или) научно-педагогических работников, участвующих в реализации программы аспирантуры, имеют ученую степень (в том числе ученую степень, полученную в иностранном государстве и признаваемую в Российской Федерации) и (или) ученое звание (в том числе ученое звание, полученное в иностранном государстве и признаваемое в Российской Федерации).

3.3.2. Квалификация руководящих и научных и (или) научно-педагогических работников ИОНХ РАН соответствует квалификационным характеристикам, установленным в Едином квалификационном справочнике должностей руководителей, специалистов и служащих, раздел «Квалификационные характеристики должностей руководителей и специалистов высшего профессионального и дополнительного профессионального образования», утвержденном приказом Министерства здравоохранения и социального развития Российской Федерации от 11 января 2011 г. № 1н (зарегистрирован Министерством юстиции Российской Федерации 23 марта 2011 г., регистрационный № 20237), и профессиональным стандартам.

3.3.3. Научный руководитель аспиранта должен иметь ученую степень доктора наук, или в отдельных случаях ученую степень кандидата наук, или ученую степень, полученную в иностранном государстве, признаваемую в Российской Федерации; осуществлять научную (научно-исследовательскую) деятельность по соответствующему направлению исследований в рамках научной специальности за последние 3 года; иметь публикации по результатам осуществления указанной научной (научно-исследовательской) деятельности в рецензируемых отечественных и (или) зарубежных научных журналах и изданиях; осуществлять апробацию результатов указанной научной (научно-исследовательской) деятельности, в том числе участвовать с докладами по тематике научной (научно-исследовательской) деятельности на российских и (или) международных конференциях, за последние 3 года.

### **3.4. Финансовое обеспечение программы аспирантуры**

3.4.1. Финансовое обеспечение реализации программы аспирантуры осуществляется на основании приказа Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 26.03.2021 г. № 209 «Общих требований к определению нормативных затрат на оказание

государственных (муниципальных) услуг в сфере высшего образования и дополнительного профессионального образования для лиц, имеющих или получающих высшее образование, молодежной политики, применяемых при расчете объема субсидии на финансовое обеспечение выполнения государственного (муниципального) задания на оказание государственных (муниципальных) услуг (выполнение работ) государственным (муниципальным) учреждением».

#### **4. Особенности организации образовательного процесса по программам аспирантуры для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

Обучение по программам аспирантуры инвалидов и обучающихся с ограниченными возможностями здоровья осуществляется ИОНХ РАН с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся.

В ИОНХ РАН созданы специальные условия для получения высшего образования по программам аспирантуры обучающимся с ограниченными возможностями здоровья. Обучение осуществляется на основе программ аспирантуры, адаптированных при необходимости для обучения указанных обучающихся.

Подробно особенности организации образовательного процесса по программам аспирантуры для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в ИОНХ РАН регламентируются локальным нормативным актом «Положением об обучении аспирантов – инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в аспирантуре ИОНХ РАН».

Ответственные за реализацию программы аспирантуры:

<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Ученая степень</b>	<b>Ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)</b>
Жижин Константин Юрьевич	д.х.н.	чл.-корр.РАН	Заместитель директора	kyuzhizhin@igic.ras.ru 8(495)775-65-70
Терехова Анна Николаевна			Зав. Учебным центром	asp@igic.ras.ru 8(495)775-65-85 доб.159

**Автор(ы) программы:**

Зам.директора ИОНХ РАН  
чл.-корр.РАН

Зав. Учебным центром

К.Ю.Жижин

А.Н.Терехова

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. Н.С. КУРНАКОВА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИОНХ РАН)



«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИОНХ РАН

акад. РАН

В.К. Иванов

2026 г.

## Рабочая программа дисциплины Хемоинформатика

**Шифр и наименование области науки:** 1. Естественные науки

**Шифр и наименование группы научных специальностей:** 1.4. Химические науки

**Шифр и наименование научной специальности:**

1.4.5. Хемоинформатика

**Форма обучения:** очная

**Нормативный срок обучения:** 4 года

Москва  
2026 г.

## 1. Общие положения

Рабочая программа дисциплины Хемоинформатика разработана в соответствии с федеральными государственными требованиями, утвержденными Минобрнауки России от 20 октября 2021 г. № 951.

Изучение дисциплины Хемоинформатика в соответствии с учебными планами подготовки аспирантов осуществляется в течение 2-го курса обучения в аспирантуре и завершается сдачей кандидатского минимума.

Целью дисциплины Хемоинформатика является формирование у аспирантов компетенций в области компьютерного представления химических структур и использования методов интеллектуального анализа данных о структуре и свойствах химических соединений и материалов.

Задачами дисциплины Хемоинформатика являются освоение аспирантами принципов кодирования химической структуры, изучение алгоритмов анализа химических баз данных и овладение методами построения прогностических и генеративных моделей «структура-свойство».

## 2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина Хемоинформатика относится к образовательному компоненту программы аспирантуры, является обязательной для освоения.

## 3. Структура и основное содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачётных единиц (288 часов).

### 3.1. Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Пр.	КСР		
1.	Хемоинформатика	288	116	34	-	82	-	172	Кандидатский экзамен по дисциплине

### 3.2. Содержание дисциплины

#### 3.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	

1	Введение в дисциплину	8	-	7	-	32
2	Представление химических объектов	6	-	15	-	28
3	Химические базы данных	5	-	15	-	28
4	Молекулярное разнообразие	5	-	15	-	28
5	Молекулярные дескрипторы	5	-	15	-	28
6	Моделирование «структура-свойство»	5	-	15	-	28

### 3.2.2. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Трудоемкость (в часах)	Форма проведения занятий
1.	Введение в дисциплину	<p>1. Хемоинформатика как научная дисциплина. Различие и комплементарность хемоинформатики, квантовой химии и методов молекулярной механики.</p> <p>2. Хемоинформатика от объектов до главных областей применения. Базовая молекулярная модель. Построение логического вывода.</p> <p>3. Химическое пространство. Органические, неорганические, координационные соединения, полимеры, композиты и иные сегментированные области химических знаний.</p> <p>4. Хемоинформатика и хеометрика.</p> <p>5. Хемоинформатика и биоинформатика.</p> <p>6. Глубокое машинное обучение в хемоинформатике.</p> <p>7. Большие данные в химии: источники, масштабы, обработка и хранение.</p> <p>8. История хемоинформатики.</p>	8	Лекции, практические занятия, самостоятельная работа аспиранта
2.	Представление химических объектов	<p>1. Типичные представления в химии (структурная формула, химическая формула, наименования).</p> <p>2. Статические и динамические представления. Симметрия физической системы.</p> <p>3. Особенности представления в хемоинформатике, требования к представлениям. Виды представлений.</p> <p>4. Линейные представления:  - имена, WLN, SMILES, SLN, InChI.  - Современные строковые представления молекул (SELFIES, DeepSMILES, CXSMILES).</p> <p>5. Языки описания химических шаблонов, реакций и подструктур (SMARTS, SMIRKS).</p> <p>6. Графовое представление:  - Молекулярный граф  - Матричное представление, виды матриц, смежность, инцидентность.</p> <p>7. Битовые строки:  - структурные ключи MACCS и PubChem,  - отпечатки пальцев, хэшированные отпечатки пальцев Daylight, ECFP и FCFP Моргана, принцип круговых отпечатков  - Табличное представление.</p> <p>8. Схематические представления: визуальные</p>	6	Лекции, практические занятия, самостоятельная работа аспиранта

		<p>представления, структуры Маркуша, хранение и генерация структур с переменными фрагментами.</p> <p>9. Трехмерные представления:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Координаты атомов и форматы их хранения (XYZ, MDL, SYBYL Mol2, PDB).</li> <li>- 3D-графы</li> <li>- Молекулярные поверхности и формы (вдв, Конноли, SASA, поверхность исключенного растворителя, Хиршфельд, поверхность полости фермента, поверхность изоплотности, сферические гармоники, поликубы)</li> </ul> <p>10. Конвертация и генерация представлений:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Конвертация структура-имя и имя-структура.</li> <li>- Конвертация структуры в линейные представления. Генерация и проекция структур.</li> <li>- Генерация таутомерных форм и протонных состояний.</li> </ul> <p>11. Представления реакций:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- наборы реагентов и продуктов</li> <li>- характеристики реакционного центра</li> <li>- разности продуктов и реагентов</li> </ul> <p>12. Машинно-обученные представления молекул:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- отличие непрерывных векторных представлений</li> <li>- скрытое пространство</li> <li>- эмбединги на основе обработки линейных представлений (токенизация, Seq2Seq, Word2Vec)</li> <li>- понятие GNN, GNN эмбединги, message passing, агрегация</li> <li>- механизмы внимания для взвешивания структурных фрагментов</li> <li>- 3D трансформеры и инвариантные представления структуры</li> </ul> <p>13. Представление кристаллических структур:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Кристаллическая решетка, пространственная группа, элементарная ячейка, фракционные координаты</li> <li>- Формат CIF</li> <li>- Представление структур в виде облаков точек (Point Clouds)</li> <li>- Специфические представления (кулоновская матрица, PRDF, разбиение Вороного, кристаллические графы и топологические представления, принцип стокхолдера, спектральные представления, метрики (квази)импульсного пространства)</li> </ul>		
3.	Химические базы данных	<p>1. Структура и архитектура баз данных. Реляционные и нереляционные (графы, документы) БД.</p> <p>2. Виды поиска в химических базах данных:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Поиск по структуре, подструктуре, суперструктуре</li> <li>- поиск по молекулярному сходству в базах данных различных типов.</li> <li>- конформационный поиск в 3D</li> </ul>	5	Лекции, практические занятия, самостоятельная работа аспиранта

		<ul style="list-style-type: none"> <li>- поиск по фармакофорным запросам</li> <li>- жесткий и гибкий поиск</li> <li>3. Алгоритмы и ускорение поиска: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Основные алгоритмы поиска. Поиск по подграфу.</li> <li>- Скрины и битовые строки для фильтрации.</li> <li>- Рекурсивный подход, алгоритм Ульмана, VF2</li> </ul> </li> <li>4. Основные химические базы данных в хемоинформатике: <ul style="list-style-type: none"> <li>- синтез данных, типы экспериментальных данных</li> <li>- Молекулярные БД (GDB, ZINC, PubChem, ChEMBL).</li> <li>- БД неорганических соединений и материалов (ICSD, CSD, COD, Materials Project, AFLOW).</li> <li>- БД химических реакций (Reaxys, Pistachio, USPTO)</li> </ul> </li> <li>5. Программный доступ к химическим базам данных и интеграция (использование RESTful API).</li> <li>6. Теоретическое моделирование для синтеза обучающих выборок: <ul style="list-style-type: none"> <li>- типы синтетических данных из теоретического моделирования, проблема верифицируемости</li> <li>- уровни теории моделирования и высокопроизводительные расчеты</li> <li>- полуэмпирические методы и особенности DFT-моделирования химического пространства</li> <li>- выбор уровня теории для ускорения вычислений, компенсация ошибок расчета</li> </ul> </li> <li>7. Курация, очистка и стандартизация химических данных: <ul style="list-style-type: none"> <li>- удаление подвыборок</li> <li>- хемотипы и их нормализация</li> <li>- работа с дубликатами</li> <li>- учет шума и неопределенности экспериментальных данных</li> </ul> </li> </ul>		
4.	Молекулярное разнообразие	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Библиотеки данных: <ul style="list-style-type: none"> <li>- разнообразие и репрезентативность.</li> <li>- использование для (высокопроизводительного) скрининга</li> </ul> </li> <li>2. Молекулярное разнообразие и сходство: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Меры сходства (Танимото, Dice, Cosine, Евклидово расстояние)</li> <li>- комбинаторные и теоретико-информационные метрики оценки сложности химических структур.</li> </ul> </li> <li>3. Методы отбора и кластеризации: <ul style="list-style-type: none"> <li>- разбросанные и сфокусированные библиотеки для скрининга</li> <li>- иерархическая и неиерархическая кластеризация (k-Means, DBSCAN)</li> <li>- Отбор без кластеризации (MaxMin, Кеннард)</li> </ul> </li> <li>4. Теоретическая комбинаторная химия <ul style="list-style-type: none"> <li>- генерация структур, Fragmenter</li> <li>- алгоритмы фрагментации RECAP и BRICS</li> <li>- Иерархический анализ молекулярных каркасов, фрагменты Бемиса-Мурко.</li> </ul> </li> <li>5. Генерация молекул методами машинного</li> </ol>	5	Лекции, практически е занятия, самостоятел ьная работа аспиранта

		<p>обучения:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Глубокие генеративные модели химических структур (вариационные автоэнкодеры, генеративно-состязательные сети и нормализующие потоки).</li> <li>- Диффузионные модели молекул и материалов.</li> <li>- Исследование химического пространства и направленная генерация структур.</li> <li>- Обучение с подкреплением для направленной генерации</li> </ul> <p>6. Метрики оценки качества генеративных библиотек (валидность, уникальность, новизна, расстояние до ближайшего соседа, внутреннее разнообразие).</p>		
5.	Молекулярные дескрипторы	<p>1. Определение и использование дескрипторов.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- роль дескрипторов в хемоинформатике</li> <li>- требования к идеальному дескриптору (инвариантность, интерпретируемость, корреляция со свойством)</li> <li>- многообразие дескрипторов.</li> </ul> <p>2. Классификация молекулярных дескрипторов по размерности</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 0D конституционные, свертка дескрипторов</li> <li>- 1D счетные</li> <li>- 2D топологические (индексы Вигнера, Рандича, Загреба, BCUT, E-State)</li> <li>- 3D структурные (геометрические, моменты, WHIM, GETAWAY)</li> <li>- 4D ансамблевые (конформационные, времязависимые)</li> </ul> <p>3. Специализированные дескрипторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- физико-химические (logP, поляризуемость, рефракция).</li> <li>- фармакофорные</li> <li>- константы заместителей (Гаммет, Тафт, электронные параметры)</li> <li>- полевые (MIF – CoMFA, CoMSIA)</li> <li>- квантово-химические (заряды, энергии орбиталей, производные энергии, функции Фукуи, концептуальная DFT)</li> </ul> <p>4. Машинно-обученные дескрипторы и автоматическое конструирование признаков:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- дескрипторы на основе обработки естественного языка и векторные представления</li> <li>- трансформеры, GNN-дескрипторы</li> <li>- механизмы внимания</li> </ul> <p>5. Специализированные дескрипторы координационных, неорганических соединений и материалов:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- полиэдр атома, радиус атома и типы лигандов</li> <li>- метрики асферичности окружения атома</li> <li>- локальное окружение SOAP, ACSF и MTP, симметрические инварианты</li> </ul>	5	Лекции, практически е занятия, самостоятельная работа аспиранта
6.	Моделирование «структура-свойство»	<p>1. Основы методологии «структура-свойство»:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- История моделирования "структура-свойство": SAR/QSAR/QSPR</li> <li>- общие принципы построения и валидации моделей</li> </ul>	5	Лекции, практически е занятия, самостоятельная работа

	<p>2. Предобработка данных для моделирования:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Удаление смесей, неорганических и металлоорганических соединений</li> <li>- Конвертация структур, удаление солей и выбор состояния ионизации</li> <li>- Нормализация хемотипов, изомеров, резонансных форм, топомеров, инвертомеров и таутомеров</li> <li>- Выявление и обработка четких и нечетких дубликатов</li> <li>- масштабирование и центрирование данных</li> </ul> <p>3. Полуавтоматический выбор и отбор дескрипторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- принципы и проблемы отбора дескрипторов</li> <li>- проблема «проклятия размерности»</li> <li>- (корреляционные) фильтры, обёртки, методы Lasso и Random Forest</li> <li>- методы PCA, tSNE и UMAP</li> </ul> <p>4. Классические методы ML для моделирования «структура-свойство»:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- задача многомерной оптимизации в хемоинформатике</li> <li>- Множественная линейная регрессия</li> <li>- Метод частичных наименьших квадратов</li> <li>- Метод k-NN</li> <li>- Метод опорных векторов</li> <li>- Деревья принятия решений</li> </ul> <p>5. Методы (n)3D-QSAR:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Выравнивание молекул в CoMFA, CoMSIA, GRID/GOLPE</li> <li>- Топомерный вариант CoMFA</li> <li>- Методы без выравнивания VolSurf и CATS</li> </ul> <p>6. Глубокое обучение в моделировании «структура-свойство»:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Нейросети прямого распространения ANN</li> <li>- Сверточные и графовы сети (примеры MPNN, GCN, SchNet)</li> <li>- Трансформеры в применении к SMILES и молекулярным графам</li> </ul> <p>7. Стратегии обучения нейросетевых моделей:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- многозадачное обучение</li> <li>- трансферное обучение</li> <li>- обучение без учителя, обучение с подкреплением (с частичным привлечением учителя)</li> <li>- самообучение и контрастивное обучение</li> <li>- активное обучение для направленного скрининга химических структур</li> <li>- модальность модели, мультимодальные модели</li> </ul> <p>8. Валидация прогностической способности моделей:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- переобучение и принцип оптимальной сложности моделей</li> <li>- внутренняя и внешняя валидация, перекрестный и скользящий контроль</li> <li>- статистические критерии качества регрессионных моделей</li> <li>- критерии качества классификационных</li> </ul>		аспиранта
--	--	--	-----------

		<p>моделей (для виртуального скрининга), точность, полнота, F1, AUC ROC</p> <p>9. Область применимости моделей:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- меры, основанные на интервалах значений дескрипторов</li> <li>- меры, основанные на расстояниях в химическом пространстве дескрипторов (ближайший сосед, плечо)</li> <li>- меры на основе оценки (дисперсии) плотности прогноза</li> <li>- меры, основанные на оценке плотностей распределения в химическом пространстве дескрипторов</li> <li>- меры на основе алгоритмов одноклассовой классификации</li> <li>- двухфакторный подход к определению области применимости модели</li> <li>- визуальный анализ эффективности методов определения области применимости моделей</li> </ul> <p>10. Интерпретация моделей и оценка неопределенности прогноза:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Методы объяснимого искусственного интеллекта (XAI) и интерпретация моделей в хемоинформатике (SHAP, LIME).</li> <li>- визуализация важности дескрипторов и их вкладов</li> <li>- оценка неопределенности прогноза и домена применимости нейросетевых моделей (ансамблевые методы и байесовские нейронные сети).</li> <li>- гауссовы процессы в байесовской оптимизации для направленного поиска</li> </ul> <p>11. Машинное обучение для теоретического моделирования</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- производные полной энергии как таргет ML</li> <li>- машинно-обучаемые межатомные потенциалы MLP и их архитектуры (ANI, SchNet, MACE, NequIP) для статических и динамических расчетов</li> <li>- активное обучение по DFT для создания MLP</li> <li>- роль инвариантности (трансляции в 4D, повороты, перестановки атомов)</li> <li>- концепция <math>\Delta</math>-ML</li> <li>- высокоуровневые квантово-химические расчеты на основе ML</li> <li>- высокопроизводительные расчеты квантово-химических дескрипторов</li> </ul> <p>12. Основные применения моделирования «структура-свойство»</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- прогноз токсичности REACH</li> <li>- прогноз ADMET-свойств</li> <li>- прогноз свойств материалов (band gap, <math>H_{\text{mix}}</math>, <math>H_{\text{form}}</math>, <math>\lambda_{\text{max}}</math>, дефектность, динамические и тепловые свойства)</li> <li>- прогноз и анализ спектральных данных</li> <li>- прогноз реакционной способности, продуктов реакций, ретросинтез</li> </ul> <p>13. Стандарты и рекомендации для моделей моделей "структура-свойство"</p>		
--	--	---	--	--

		- принципы Сетибала (ОЭСР) - рекомендации Унгера-Ганча и Тропши по "наилучшей практике" - физическое информирование представлений, дескрипторов и моделей		
--	--	---	--	--

### 3.2.3. Самостоятельная работа

Рабочей программой дисциплины Хемоинформатика предусмотрена самостоятельная работа аспиранта.

Самостоятельная работа распределяется по видам учебных занятий следующим образом:

- проработка лекционного материала по конспекту и учебной литературе;
- проработка актуальных вопросов, чтение и конспектирование первоисточников.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций. Основные виды самостоятельной работы: в читальном зале библиотеки, в домашних условиях с доступом к ресурсам Интернет.

### 3.2.4. Образовательные технологии

Основными образовательными технологиями, используемыми при реализации учебной работы, являются лекции, семинары ведущих отечественных и зарубежных ученых и консультации с преподавателями; проведение практических работ, участие обучаемых в научной работе и выполнение исследовательских проектов.

## 4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

### 4.1. Текущий контроль успеваемости

Основной контроль знаний осуществляется в процессе участия в практических занятиях.

### 4.2. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины

Промежуточная аттестация по дисциплине Хемоинформатика проводится на 3 курсе в форме экзамена (кандидатского экзамена по дисциплине), предусматривающего ответы на вопросы.

Вопросы для подготовки к сдаче экзамена (кандидатского экзамена) по дисциплине Хемоинформатика приведены в Программе кандидатского экзамена по Хемоинформатике.

С целью оценки уровня знаний на экзамене (кандидатском экзамене) используется 5-балльная система в соответствии с критериями, представленными в таблице:

#### Критерии оценки

«Отлично»	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве овладел всеми вопросами дисциплины, показал все требуемые умения и навыки
«Хорошо»	Аспирант овладел всеми вопросами дисциплины, показал основные умения и навыки
«Удовлетворительно»	Аспирант имеет недостаточно глубокие знания по разделам дисциплины, показал не все основные умения и навыки

«Неудовлетворительно»	Аспирант имеет проблемы по отдельным разделам дисциплины и не владеет основными умениями и навыками
-----------------------	---

## 5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 5.1. Рекомендуемая литература

При изучении дисциплины аспиранты используют основную и дополнительную литературу, рекомендованную преподавателем. Кроме того, преподаватель может рекомендовать аспиранту ознакомиться с дополнительными материалами методического характера.

Название электронного или печатного ресурса (основная или дополнительная)	Тип
<p><b>Основная литература:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Введение в хемоинформатику. Серия учебных пособий (в 5 ч.). Т.И. Маджидов и др. – Казань, издательство Казанского университета, 2013-2017.</li> <li>2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хельтье и др. /М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - Пер. изд. : Molecular Modeling. Basic Principles and Applications. - Weinheim, 2008. - ISBN 978-5-9963-0156-0 3.</li> <li>3. A.R. Leach, V.L.Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.</li> <li>4. Ramachandran, K. I. Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications: монография / К. I. Ramachandran, G. Deera, K.Namboori. - Berlin: Springer, 2008. - XXI, 397 p.: ил. - Библиогр. в конце глав. - Указ.: с. 391-397. - ISBN 978-3-540-77302-3: 3167.00 p.</li> <li>5. Chemoinformatics. Advanced Control and Computational Techniques / ed. H.G. Gilani, K. G. Samper, R. K. Haghi. - New York : Apple Academic Press, 2013. -VIII, 204 p. - ISBN 978-1-926895-23-9 :</li> <li>6. Леск, А. Введение в биоинформатику / - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - Пер. изд. : Introduction to bioinformatics / A. M. Lesk. - Oxford, 2002. - ISBN 978-5-94774-501-6</li> </ol>	печ.
<p><b>Дополнительная литература:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Tutorials in Chemoinformatics. / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH. 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2</li> <li>2. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin. Springer, 2003. 649 p.</li> <li>3. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / отв. ред. В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. - М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2009. – 662 с. ISBN 978-5-397-01119-8.</li> <li>4. Френкель, Даан. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям / М.: Научный мир, 2013. -559 с. - Пер. изд.: Understanding molecular simulation. From Algorithms to Applications / D. Frenkel, B. Smit. - Boston [et al.], 2002. - ISBN 978-5-91522-223-5.</li> <li>5. Структура и функционирование белков. Применение методов биоинформатики / под ред., пер. с англ. В. Н. Новоселецкий; пер. с англ. Е. Д. Балицкой, пер. Т. В. Науменковой. - М.: Ленанд, 2014. - 414 с. ISBN 978-5-9710-0842-2.</li> <li>6. Schlick, Tamar. Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide / New York [et al.]: Springer-Verlag, 2002. 634 p. ISBN 0-387-95404-X: 2680.00 p.</li> <li>7. Бейдер, Ричард. Атомы в молекулах: квантовая теория / М.: Мир, 2001. - 532 с. ISBN 5-03-003363-7.</li> <li>8. Chemoinformatics for Drug Discovery: сборник / ed. by J. Vajorath. - Hoboken [et al.]: John Wiley &amp; Sons, 2014. ISBN 978-1-118-13910-3.</li> <li>9. Brereton, Richard G. Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant / R. G. Brereton. - Chichester : WILEY, 2003. ISBN 0-471-48977-8.</li> </ol>	печ.

- |   |  |
|---|--|
| <p>10. The Handbook of Environmental Chemistry / With contributions by T. E. Barnard etc.; Ed. by O. Hutzinger. - Berlin etc. : Springer-Verlag, 1995. Vol. 2, pt. G: Chemometrics in Environmental Chemistry. Statistical Methods: ISBN 3-540-58941- 4. ISBN 0-387-58941-4. ISBN 0-387-58941-4.</p> <p>11. Шараф, Мухаммад А. Хемометрика / Л.: Химия. Ленинградское отделение, 1989. - 269 с. - ISBN 5-7245-0361-1. Пер. изд.: Chemometrics / M. A. Sharaf etc.- New York etc., 1986.</p> <p>12. Померанцев, Алексей Л. Хемометрика в Excel: учеб. пособие для вузов / Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. - 434 с.</p> <p>13. Плас, Дж. Вандер. Python для сложных задач наука о данных: и машинное обучение: монография / Санкт-Петербург [и др.] : Питер, 2018. – 572 с. Пер. изд.: Python Data Science Handbook. Essential Tools for Working with Data / J. V.Plas. - Beijing [et al.], 2017. - ISBN 978-5-496-03068-7.</p> |  |
|---|--|

## 5.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы:

- «Journal of Chemical information and modeling»
- «Molecular informatics»
- «Journal of Chemical Theory and Computation»
- «Journal of Cheminformatics»
- «Bioinformatics»
- «Drug Discovery Today»
- «Журнал структурной химии»
- «Журнал физической химии»
- «Journal of Computer-Aided Molecular Design»
- «Journal of Molecular Graphics and Modelling»
- «Journal of Applied Crystallography»
- Электронный учебный курс «Everything you need to get started in medical billing & coding» – <https://www.medicalbillingandcoding.org/what-is-mbac/>

## 5.3. Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. Федеральный портал «Российское образование» - <http://www.edu.ru/>;
2. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - <https://www.elibrary.ru/>.

## 6. Требования к материально-техническому обеспечению программы

ИОНХ РАН располагает материально-технической базой, соответствующей требованиям материального обеспечения дисциплины.

Аудитории для проведения занятий оснащены компьютерами и проекторами для показа мультимедийных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в

Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Материально-техническая база соответствует действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивает проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы аспирантов.

<b>Информация о материально-технической базе, используемой при осуществлении образовательной деятельности по программе</b>	
<b>№ аудитории/форма проведения занятия</b>	<b>Наименование оснащенного помещения, с перечнем основного оборудования (с указанием количества)</b>
Ауд. 725 для проведения лекционных/практических занятий	Стол, стулья, доска настенная, посадочные места на 15 человек, проекционное оборудование, экран. Доступ в интернет и обеспечение доступа в ЭИОС института. Переносной ноутбук – 1 шт. Проектор – 1 шт. Экран для проектора – 1шт. Указка лазерная – 1шт. Доска магнитно-маркерная – 1 шт.
Ауд. 703 для проведения лекционных/практических занятий	Стол, стулья, доска настенная, посадочные места на 22 человека, проекционное оборудование, экран. Доступ в интернет и обеспечение доступа в ЭИОС института. Переносной ноутбук – 1 шт. Проектор – 1 шт. Экран для проектора – 1шт. Указка лазерная – 1шт. Доска магнитно-маркерная – 1 шт.
Комната 208. Хранение и профилактическое обслуживание учетного оборудования	Компьютер в комплекте: системный блок interCorei3 - 1шт. Монитор черный Beng. Клавиатура – 2шт. Мышь – 2шт. Компьютер в комплекте: Системный блок inter Core i5/8GbDDR4/ASUS Монитор BengGW 2270 черный МФУ – 1шт. МФУ imageRUNNERC3051, цветной Проектор SonyVPL –DW 122. Экран на штативе ClassicScutum 160*160 Экран мобильный 180*180 в комплекте DSK -1102.

**Автор(ы) программы:**

Зав.Центром Цифрового материаловедения, в.н.с., д.х.н.

А.А. Павлов

Зав.лаб. Квантовой химии, в.н.с., д.ф.-м.н.

И.В. Ананьев

Зав.Учебным центром

А.Н. Терехова